

PAT-NO: JP409229849A

DOCUMENT-IDENTIFIER: JP 09229849 A

TITLE: POLYCHROMATOR

PUBN-DATE: September 5, 1997

INVENTOR-INFORMATION:

NAME

FUJIWARA, KANJI

FUKUDA, SEIICHI

ASSIGNEE-INFORMATION:

NAME

JASCO CORP

COUNTRY

N/A

APPL-NO: JP08061665

APPL-DATE: February 26, 1996

INT-CL (IPC): G01N021/27

ABSTRACT:

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a polychromator by which a spectroscopic analysis can be performed with a high resolution over a wide wavelength (wave number) range.

SOLUTION: A diffraction grating 3 is turned by a driving gear 6, the angle of incidence α ; of measuring light is made changeable, and optical systems 1, 2, 4 are arranged in such a way that the measuring light is diffracted and that a light component at every diffraction angle according to the angle of incidence is image-formed in every channel on a multichannel detector 5 such as a CCD or the like. Then, the driving gear is driven by a control instruction from a signal processor 7, the diffraction grating 3 is turned during a

measurement, outputs, of the detector 5, which are received before and after its rotation are received, and data in a range which is wider than a range detectable simultaneously by the detector are acquired so as to be stored in a buffer 7a. In a correction part 7b, measured data which are acquired before and after its rotation are coupled, a prescribed correction processing operation is performed in apart in which the data are tied in their coupling, and smooth and continuous spectrum data is generated and output.

COPYRIGHT: (C)1997,JPO

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平9-229849

(43) 公開日 平成9年(1997)9月5日

(51) Int.Cl.⁶

G 0 1 N 21/27

識別記号

序内整理番号

F I

G 0 1 N 21/27

技術表示箇所

B

審査請求 未請求 請求項の数 6 F D (全 8 頁)

(21) 出願番号 特願平8-61665

(22) 出願日 平成8年(1996)2月26日

(71) 出願人 000232689

日本分光株式会社

東京都八王子市石川町2967番地の5

(72) 発明者 藤原 幹治

東京都八王子市石川町2967番地の5 日本
分光株式会社内

(72) 発明者 福田 清一

東京都八王子市石川町2967番地の5 日本
分光株式会社内

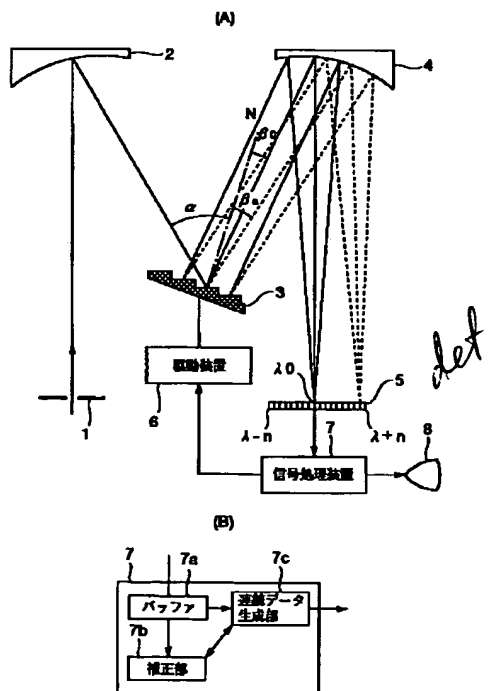
(74) 代理人 弁理士 松井 伸一

(54) 【発明の名称】 ポリクロメータ

(57) 【要約】

【課題】 広範囲の波長(波数)範囲にわたって高分解能の分光分析を行うことができるポリクロメータを提供すること

【解決手段】 駆動装置6により回折格子3を回転させ、測定光の入射角 α を変更可能とし、そこで回折させて入射角に応じた各回折角の光成分がCCD等の多チャンネル検出器5上の各チャンネルに結像されるように光学系1, 2, 4を配置する。そして、信号処理装置7からの制御命令により駆動装置を駆動させ、測定中に回折格子を回転させ、回転の前後で受光された検出器5の出力を受け取り、その検出器5で同時に検出可能な範囲よりも広い範囲のデータを取得し、バッファ7aに格納する。補正部7bにて、回転の前後で取得された測定データを結合するとともに、その結合の際につなぎ合わせの部分で所定の補正処理を行い平滑な連続したスペクトルデータを生成し、出力するようにした。



【特許請求の範囲】

【請求項1】 測定対象の光を回折させる回折格子と、前記回折格子で回折された光を、波長または波数成分ごとに受光する多チャンネル検出器と、前記多チャンネル検出器の出力を受け、所定の信号処理を行いスペクトルデータを生成するとともに出力する信号処理手段とを備えたポリクロメータにおいて、前記信号処理手段が、測定中の所定のタイミングで前記回折格子を所定角度回転させ、回転の前後で受光された前記多チャンネル検出器の出力を受けとり、前記多チャンネル検出器で同時に検出可能な範囲よりも広い範囲のデータを取得し、回転の前後で取得された測定データを結合するとともに、その結合の際につなぎ合わせの部分で所定の補正処理を行い平滑な連続したスペクトルデータを生成する補正手段をさらに備えたことを特徴とするポリクロメータ。

【請求項2】 前記補正手段の補正機能が、前記チャンネル幅で受光されるスペクトル幅の異なりに基づいて、光強度の補正を行うようにしたことを特徴とする請求項1に記載のポリクロメータ。

【請求項3】 前記補正手段が、前記回折格子の回転の前後のデータの検出領域を一部重複させてつなぎ領域を設定するとともに、そのつなぎ領域に属する回転前及び回転後に得られたデータの少なくとも1つが、同一の波長または波数を有し、その同一の波長または波数で一致するように、前記回転前後の検出データを結合する機能を有することを特徴とする請求項1または2に記載のポリクロメータ。

【請求項4】 前記同一の波長または波数が、前記つなぎ領域の中央付近に存在するようにしたことを特徴とする請求項3に記載のポリクロメータ。

【請求項5】 前記補正手段が、前記回折格子の回転の前後のデータの検出領域を一部重複させてつなぎ領域を設定するとともに、前記つなぎ領域内の任意の波長または波数についての光強度の補正値を求めるに際し、各回に求めたスペクトルデータの端部側に位置するデータほど荷重を小さくして荷重平均を求める機能を有することを特徴とする請求項1または2に記載のポリクロメータ。

【請求項6】 前記つなぎ領域中に存在する回転前及び回転後に得られたデータの少なくとも1つが、同一の波長または波数を有し、その同一の波長または波数で一致するように、前記回転前後の検出データを結合した後、前記荷重平均を用いた補正処理を行うようにしたことを特徴とする請求項5に記載のポリクロメータ。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】 本発明は、ポリクロメータに関するものである。

【0002】

【従来の技術】よく知られているように、ポリクロメータは、入射スリットを介して入射された光を、凹面鏡にて平行光束に変換後、回折格子に照射して回折・分散させる。そして、その分散された光を凹面鏡で収束し、分散して得られた各波長（波数）成分の光をCCD等の多チャンネル検出器で受光するようになっている。

【0003】そして通常は、回折格子を回転させて検出器上に結像するスペクトル領域が所望の値になるように設定し、その状態で測定を行う。そして、1回の測定の間は、回折格子は、上記設定した所定角度を保持するようにしている。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】しかしながら、上記した従来のポリクロメータでは、分解能を高くしようとすると、分散の小さい回折格子を使用することになり、一度に測定できる波長（波数）レンジが小さくなり、広範囲な測定ができない。一方、広範囲な測定を行うためには、照射された光を大きく分散させる回折格子を使用することになるが、そうすると、分解能が低くなり高精度な分光分析をすることかできなくなる。このように従来の装置では、分解能を高くした高精度な測定を広範囲にわたって行うことができなかった。

【0005】本発明は、上記した背景に鑑みてなされたもので、その目的とするところは、上記した問題を解決し、広範囲の波長（波数）範囲にわたって高分解能の分光分析を行うことができるポリクロメータを提供することにある。

【0006】

【課題を解決するための手段】上記した目的を達成するために、本発明に係るポリクロメータでは、測定対象の光を回折させる回折格子と、前記回折格子で回折された光を、波長または波数成分ごとに受光する多チャンネル検出器と、前記多チャンネル検出器の出力を受け、所定の信号処理を行いスペクトルデータを生成するとともに出力する信号処理手段とを備えたポリクロメータにおいて、前記信号処理手段が、測定中の所定のタイミングで前記回折格子を所定角度回転させ、回転の前後で受光された前記多チャンネル検出器の出力を受け取り、前記多チャンネル検出器で同時に検出可能な範囲よりも広い範囲のデータを取得し、回転の前後で取得された測定データを結合するとともに、その結合の際につなぎ合わせの部分で所定の補正処理を行い平滑な連続したスペクトルデータを生成する補正手段をさらに備えるように構成した（請求項1）。

【0007】そして、上記補正手段の具体的な機能としては、例えば前記チャンネル幅で受光されるスペクトル幅の異なりに基づいて、光強度の補正を行うことができる（請求項2）。

【0008】また、請求項1または2を前提とし、前記

3

回折格子の回転の前後のデータの検出領域を一部重複させてつなぎ領域を設定するとともに、そのつなぎ領域に属する回転前及び回転後に得られたデータの少なくとも1つが、同一の波長または波数を有し、その同一の波長または波数で一致するように、前記回転前後の検出データを結合する機能を有するような補正機能を付加してもよい(請求項3)。

【0009】そして、その場合に前記同一の波長または波数が、前記つなぎ領域の中央付近に存在するように設定すると、好ましい(請求項4)。

【0010】また、別の構成としては、前記補正手段が、前記回折格子の回転の前後のデータの検出領域を一部重複させてつなぎ領域を設定するとともに、前記つなぎ領域内の任意の波長または波数についての光強度の補正値を求めるに際し、各回に求めたスペクトルデータの端部側に位置するデータほど荷重を小さくして荷重平均を求める機能を付加することである(請求項5)。

【0011】そして、係る場合に、前記つなぎ領域中に存在する回転前及び回転後に得られたデータの少なくとも1つが、同一の波長または波数を有し、その同一の波長または波数で一致するように、前記回転前後の検出データを結合した後、前記荷重平均を用いた補正処理を行うようにすると、より好ましい(請求項6)。

【0012】なお、「回転の前後」と規定したのは、隣接する任意の2つのスペクトルデータの接続部分に着目したもので、本発明では係る処理を繰り返し行うことにより、3つ以上のスペクトルデータ(領域)を結合し、より広範囲な測定領域についての計測を可能とするのももちろん含む。

【0013】本発明では、広い測定領域(波長/波数領域)を複数の区分に分割し、その分割された小さい領域(隣接する領域同士は、つなぎ領域で一部重複する場合もあり、重複せずに接している場合もある)ごとにスペクトルデータを取得し、それらを結合する。これにより、一度に検出する領域は小さくてよいので、高分解能の回折格子を用いて高精度に分光分析を行えとともに、結合することにより最終的に広範囲の領域で連続したスペクトルデータが得られる。

【0014】そして、単純に検出したデータをそのまま結合すると、その結合部分で疑似ピークなど発生するが、本発明では、請求項2以降に具体的に示したように各種の補正を行うことにより、結合部分も滑らかに接続された平滑なスペクトルデータが得られる。

【0015】

【発明の実施の形態】図1は、本発明に係るポリクロメータの好適な実施の形態の一例を示している。同図に示すように、測定光が、入射スリット1を介して第1の凹面鏡2に照射され、そこにおいて反射されて平行光束となり回折格子3に照射されるように配置している。さらに、回折格子3にて回折・分散された光が第2の凹面鏡

4

4にてさらに反射され、所定の波長(離散的)の光成分がCCD等の多チャンネル検出器5上の各チャンネルに結像されるようになっている。

【0016】さらに、回折格子3は、駆動装置6により所定の角度範囲で回転し、第1の凹面鏡2で反射される平行光束の光の入射角 α を変更し、多チャンネル検出器5に結像される波長領域を変更可能としている。そして、駆動装置6としては、例えばサインバーとパルスモータとにより構成される。なお、この駆動装置6の構成自体は、従来のもの(測定開始時に、初期設定として回折格子を所定角度に設定するためのもの)と同様のものを用いることができる。

【0017】また、多チャンネル検出器5で受光した光信号を電気信号に変換し、次段の信号処理装置7に与える。そして、信号処理装置7にて所定の信号処理を行い、スペクトルデータを生成し、モニタ8等の出力装置に出力するようにしている。なお、多チャンネル検出器5からの出力信号に基づいてスペクトルデータを生成する基本的な信号処理は、従来のものと同様であるので、具体的な説明を省略する。

【0018】ここで本発明では、信号処理装置7からの制御信号に基づいて1回の測定の途中で駆動装置6を作動させて、回折格子3を所定角度回転させ、その回転前後に多チャンネル検出器5で受光された光信号を合成し、多チャンネル検出器5で一度に受光可能な波数範囲よりも広い測定波数領域についての連続したスペクトルデータを生成するようになっている。

【0019】すなわち、多チャンネル検出器5の中心の波長を λ_0 とし、多チャンネル検出器5のチャンネル数を $2N$ とすると、多チャンネル検出器5で一度に検出できる波長領域は、 $\lambda_0 - N \sim \lambda_0 + N$ となる。そして、1回目に上記範囲で測定を行ったとすると、1回目の最大波長である $\lambda_0 + N$ が2回目の最小波長(最大波長は $\lambda_0 + 2N$)になるように中心波長を設定する。以後、必要に応じて所定回数だけ測定レンジを替えながら測定する。なお、 λ_0 の添え字である $-N$, 0 , N 等は、多チャンネル検出器5の各チャンネルに結像する波長を特定するためのもので、必ずしも、波長の物理的な大きさと等価ではない。つまり、 $\lambda_0 + N$ の2倍の波長が $\lambda_0 + 2N$ になるものではない。

【0020】これにより、例えば図2に示すように、測定したい波長範囲が $\lambda_0 - N \sim \lambda_0 + 2N$ で、所望の高い分解能によって一度に測定できる波長範囲が $\lambda_0 - N \sim \lambda_0 + N$ とすると、2回に分けて測定し、それらを合成することにより、所望の分解能で広い範囲の測定が可能となる。つまり、測定対象の光を入射した状態でまず回折格子3を所定の角度位置に設定することにより、R1の領域についてのスペクトルデータを得る。次いで、回折格子3を回転させて所定の角度位置に変更し、R2の領域についてのスペクトルデータを得る。そして、それらを結合することにより、一連のスペクトルデータが生成される。

5

【0021】ところで、単純に測定して得られたスペクトルデータを生データのまま結像すると、各チャンネルにおける単色度が異なっているため、各チャンネルにおけるスペクトル幅が異なり、出力される信号強度と真のスペクトル強度とは必ずしも等しくない。さらに、凹面鏡の収差その他の光学系の要因から、多チャンネル検出器5の中央部と両端とでも誤差が生じる。そこで本発明では、上記信号処理装置7にバッファ7aを内蔵して回折格子3を回転させる都度多チャンネル検出器5から出力される光強度データ（離散的データ）を一時的に格納する第1バッファ7aと、その第1バッファ7aに格納されたデータに対して所定の補正処理を行う補正部7b*

$$\lambda_n = \frac{d}{m} (\sin \alpha + \sin \beta_n)$$

$$\text{ここで、} \beta_n = \beta_0 + 0.5 \cdot \tan^{-1} (n \cdot w / f)$$

d : 回折格子の格子定数

w : マルチ検出器の1チャンネルの横幅

f : ポリクロメータのカメラ鏡の焦点距離

i₀ : ポリクロメータの回折格子への入射角

γ₀ : 中心波数の入射光線と回折光線が挟む角の半分

従って、n番目のチャンネルにおけるスペクトル幅は、次式で与えられる。 ※【0024】

$$\Delta \lambda_n = \frac{d \cdot \cos \beta_n}{m \cdot f} w$$

※【数2】
Δλ_n : n番目の検出素子に対応するスペクトル幅

d : 回折格子定数

f : フォーカシングミラーの焦点距離

w : 検出素子の幾何学的幅

よって、検出器からの各チャンネルnの出力値P_{n0}に対し、上記スペクトル幅Δλ_nを用いて下記式により補正処理を行い、真のスペクトル値P_nを求める。

$$\text{【0025】 } P_n = P_{n0} / \Delta \lambda_n \quad \dots (1)$$

そして、上記のようにして求めた各スペクトル値（補正後光強度）P_nを連続データ精製部7cに送り、各点を含む連続した曲線を生成し、出力するようにしている。これにより、境界部分で段差なく接続されることになる。なお、補正した各光強度をそのまま出力するようにしてもよい。

【0026】上記した第1の実施の形態では、隣接する境界部分の1チャンネルで波長を合わせるようにしたが、本発明はこれに限ることはなく、境界近傍の波長領域を重複するようつなぎ領域を設定するように測定してもよい。

【0027】ところで、上記のように複数回に分けてスペクトルデータを得ると、各回での多チャンネル検出器★50

6

*を設け、各検出された光強度のデータを補正した状態で結合するようにした。

【0022】そして、補正部7bの具体的な補正処理として、第1の実施の形態では、各チャンネルにおけるスペクトル幅を近似計算し補正するようにした。すなわち、各チャンネルにおけるスペクトル幅は、図1においてそれぞれのチャンネルに対応する回折角をβ₀、β_nとすると、中心波長λ₀からn番目のチャンネル位置の波長λ_nは次式で与えられる。

※【0023】

【数1】

★5における各チャンネルで受光される波長成分は、波長軸（横軸）で等間隔になっていない。従って、つなぎ領域で低い波長側と高い波長側で実際に測定して得られた波長が一致する箇所が存在しないおそれがある。すると、接合する際に波長の軸方向あわせがしにくくなる。

【0028】更に、連続して出射されてくる測定光を受光するものの、測定光が常に全く同じ状態にあるとは限らず、更にその他のノイズ成分等も時々刻々と変わるので、検出したレベルが微小変動するおそれがある。

【0029】そこで、第2の実施の形態では、補正部7bの機能を図3に示すフローを実行するようにし、上記問題を解決するようにした。すなわち、回折格子を回転させつつその都度多チャンネル検出器5から出力される離散的スペクトルデータ（各チャンネルで受光した光強度データ）を取得し、バッファ7aに一時的に格納する（ST1）。

【0030】また、この回折格子を回転する際に、図4

に示すように、ある回で測定して得られたスペクトルデータ①の波長間隔が $\Delta\lambda 1$ となり、別の回で測定して得られたスペクトルデータ②の波長間隔が $\Delta\lambda 2$ となり、 $\Delta\lambda 1$ と $\Delta\lambda 2$ が等しくない場合に、つなぎ領域R内のデータのうち少なくとも1個の測定データの波長 λm が等しくなるようにする。

【0031】次に、係る波長 λm が一致するように両スペクトルデータ①、②を結合する(ST2)。なお、多チャンネルマルチ検出器5は、チャンネルの中央の方が精度がよいので、波長を一致させる位置は、つなぎ領域Rの中央部分で行うのが好ましいが、端の方で一致させるようにしてももちろんよい。

【0032】更に本例では、縦軸方向の補正を行う。すなわち、まず一致させた波長 λm における光強度が同じか否かを判断し(ST3)、異なる場合には、更に縦軸方向の補正を行う(ST4)。この縦軸方向の補正は、両スペクトルデータ①、②における λm の光強度の平均を求め、その平均値を λm の光強度とする。

【0033】次いで、両スペクトルデータ①、②のうち波長 λm を検出したチャンネルも外側のチャンネルで検出したデータを無効データとして除去する(ST5)。これにより、図5に示すような離散的な測定データ(λm の補正データを×で示す)が得られるので、そのデータを連続データ生成部7cに送り、各データ点を結ぶ曲線を求め、連続した一連のスペクトルデータを形成し(図5中波線で示す)、出力する。なお、この曲線を求める手法は従来のものをそのまま適用できる。

【0034】なお、本発明では、上記した縦軸方向の補正は必ずしも行う必要はなく、横軸を合わせた状態で終了してもよい。そして、横軸を合わせた後、その離散的なデータをそのまま出力するようにしてもよく、またその出力の際に、上記したステップ5で行ったような無効データを抽出し、それを除いて出力するようにしてもよく出力の形態は種々の態様をとることができる。

【0035】さらにまた、結合するスペクトルデータは、測定して得られた生データでもよく、また、上記した第1の実施の形態における式(1)の補正を行ったものでもよい。そして特に予め式(1)による補正を行った場合には、縦軸方向のずれが生じにくいので、縦軸方向の補正処理がなくても精度のよい連続したスペクトルデータが得られる。

【0036】そして、上記した実施の形態を実際に行ったところ、図6に示すような連続したスペクトルデータ①'~③'を得ることができた。そして、この例では、3つのスペクトルデータを結合したものである。なお、波長等間隔データに変換後、単に横軸を合わせるようにすると、つなぎ目部分で図中破線で示すような疑似ピークPが発生することが確認された。

【0037】上記した第2の実施の形態では、つなぎ領域R中の一致した波長のデータ以外の測定データは、一

方を無効データとして除去したが、つなぎ領域中に存在するすべてのデータを用いて補正処理するようにしてもよく、係る機能を備えたのが第3の実施の形態である。具体的には、以下のような機能を有する。

【0038】すなわち、波長の一致を考えずに、スペクトルデータを取得し、バッファ7aに格納する。この様にして一時的に保持された波長不等間隔の離散的な生データに基づいて、連続データ生成部7cにて多項式近似、スプラインもしくはラグランジュ補間を行い連続した波長等間隔データに変換する。これにより、例えば図7に示すようなスペクトルデータ①'、②'が得られる。なお、この連続データ生成部7cは、従来の装置における信号処理の基本機能を実施するものに相当する。

【0039】そして、つなぎ領域Rの各位置で、加重平均を求め、その加重平均により得られたデータを用いて、つなぎ領域Rの両側に存在するスペクトルデータを結合するようにしている。具体的には、上記したように多チャンネルマルチ検出器の各チャンネルで検出したデータの正確度は中央の方が高いことに着目する。すると、つなぎ領域Rの一方の端部A点における2つのデータは、スペクトルデータ②'のデータD_{2A}の方が精度がよい。そして、他方の端部B点では、逆にスペクトルデータ①'のデータD_{1B}の方が精度がよい。従って、A点ではスペクトルデータ②'のデータD_{2A}の加重を1、スペクトルデータ①'のデータD_{1A}の加重を0とし、B点ではスペクトルデータ②'のデータD_{2B}の加重を0、スペクトルデータ①'のデータD_{1B}の加重を1とする。そして、その中間の加重は0~1の均等割りとする。係る処理を補正部7bで行う。

【0040】そして、そのようにして得られた補正点を、連続データ生成部7cに送り、各点を結ぶ曲線を求めることにより、図中破線で示すような補正曲線を含む連続したスペクトルデータが得られるようになる(なお、本例でも、連続した曲線を求めることなく、離散的な点データの集合の状態での出力するようにしてももちろんよい)。

【0041】また、本実施の形態でも、上記した第2の実施の形態のように、つなぎ領域R中の任意の点で波長が一致するように各スペクトルデータを取得し、その波長を基準として横軸あわせの補正を行い、その後上記した加重平均による補正を行うとなおよい。そして、その場合に均等割りする際に上記合わせた波長を含むようにするとより正確なものとなる。

【0042】なお、上記した各実施の形態並びに変形例では、いずれも波長について求めるものについて説明したが、本発明ではこれに限ることはなく、波数でももちろんよい。

【0043】

【発明の効果】以上のように、本発明に係るポリクロメータでは、同時に検出する波長(波数)領域は狭くする

9

ことにより、高分解の測定が可能となり、しかも、回折格子を回転させて、多チャンネル検出器で受光される領域を異ならせ、複数回にわたって取得したデータを結合し、しかもその結合の際に補正手段を用いて所定の補正処理を行うようにしたため、広範囲の波長(波数)範囲にわたって滑らかで段差のないスペクトルデータが得られる。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明に係るポリクロメータの実施の形態の一例を示す図である。

【図2】第1の実施の形態の機能を説明する図である。

【図3】第2の実施の形態の機能を説明するフローチャートである。

10

【図4】第2の実施の形態の作用を説明する図である。

【図5】第2の実施の形態の作用を説明する図である。

【図6】第2の実施の形態の実験結果を示す図である。

【図7】第3の実施の形態の作用を説明する図である。

【符号の説明】

3 回折格子

5 多チャンネル検出器

6 駆動装置

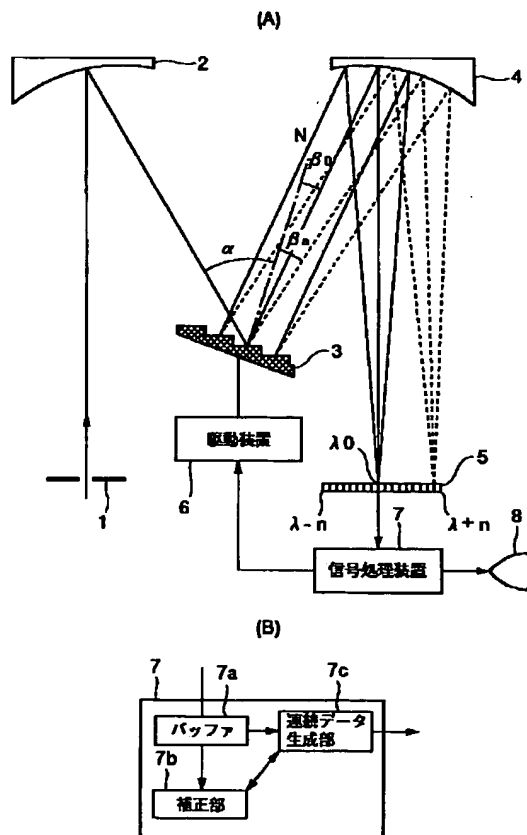
7 信号処理装置

10 7a バッファ

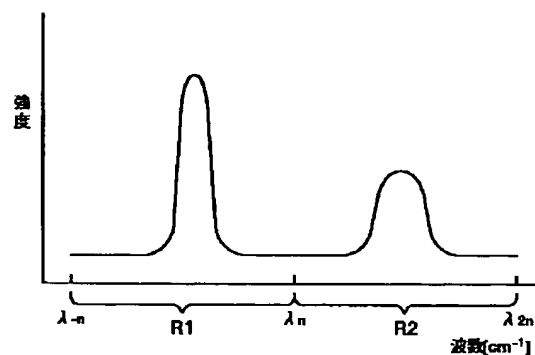
7b 補正部

7c 連続データ生成部

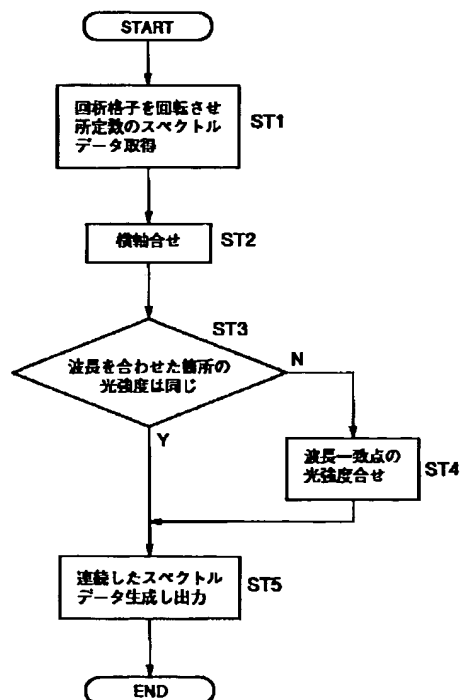
【図1】



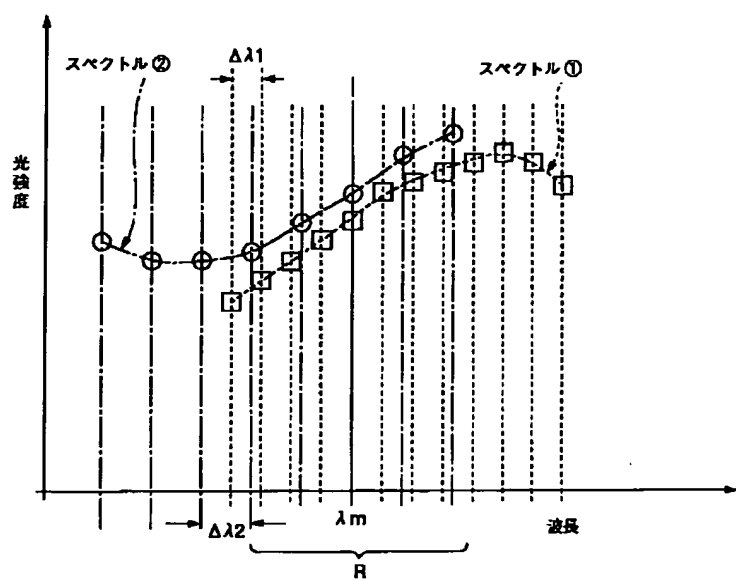
【図2】



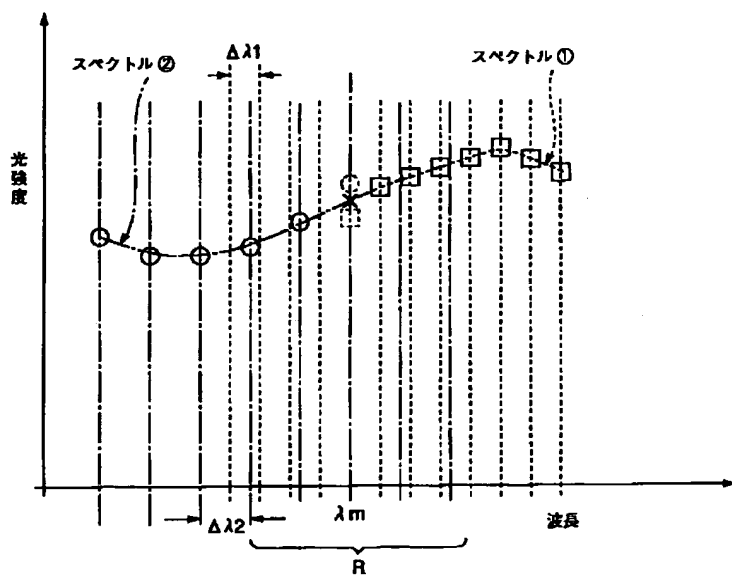
【図3】



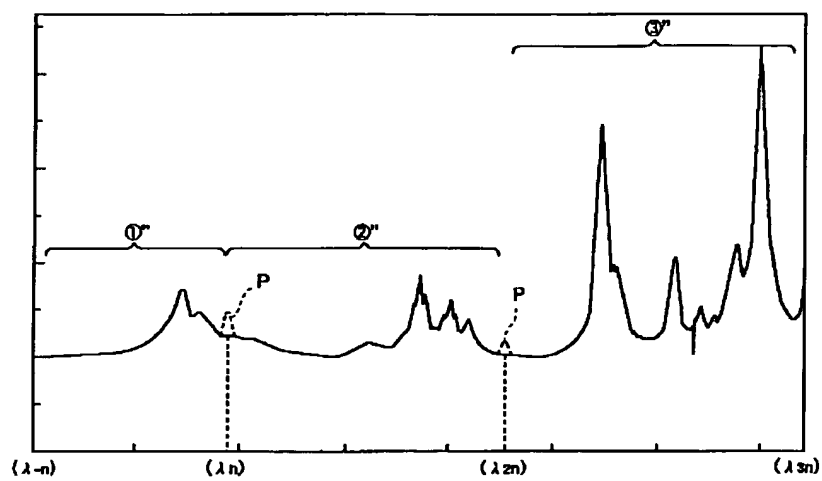
【図4】



【図5】



【図6】



【図7】

